

Tomography-based characterization of porous media applied to snow, bone scaffolds and reticulated ceramics

Doctoral Thesis**Author(s):**

Zermatten, Emilie

Publication date:

2014

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010069190>

Rights / license:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

DISS. ETH NO. 21668

**TOMOGRAPHY-BASED
CHARACTERIZATION OF POROUS
MEDIA APPLIED TO SNOW, BONE
SCAFFOLDS AND RETICULATED
CERAMICS**

A thesis submitted to attain the degree of
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by
EMILIE ZERMATTEN
Master of Science MSc en Physique, EPFL
born on 28.07.1985
citizen of St-Martin (VS)

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Aldo Steinfeld, examiner
Prof. Dr. Sophia Haussener, co-examiner
Dr. Martin Schneebeil, co-examiner

2013

Abstract

Tomography based direct pore-level simulations are applied to characterize porous media. The methodology used consists of obtaining the exact 3D geometry of porous media by the use of micro-computed tomography, which is used in discrete scale simulations for the determination of their effective heat and mass transfer properties. Morphological characteristics are obtained by two-point correlation function as well as morphology operations. Finite volume techniques are used to numerically solve the mass and momentum conservation equation to determine mass transport properties. Monte Carlo ray tracing allows for the acquisition of radiative properties.

The heat and mass transport properties of porous media are important for a wide range of applications. In particular, the application to snow, bone tissue engineering and solar thermochemical processes are of interest. In each of these fields, the study of the microstructure of the multiphase media is essential for the comprehension of natural phenomena or the improvement of a technical process. For this purpose, the determination of the effective transport properties of various porous media used in volume averaging models is crucial. This thesis is dealing with the determination of mass transport properties of snow, wall shear stress level in porous scaffold used for in-vitro bone formation and the radiative properties of a reticulated porous ceramic made of ceria, used in solar thermochemical processes.

Two different works are performed on snow, each with a particular sample set. The first study considers five samples, characteristics for a wide range of seasonal snow. Their 3D geometrical representations are obtained by micro-computed tomography and used in direct pore-level simulations to numerically solve the governing mass and momentum conservation equations. The second order extension to Darcy's law is used to determine permeability and the Dupuit–Forchheimer coefficient. Simplified semi-empirical models of porous media are examined. The second set of snow consists of 34 samples, already characterized experimentally and casted with dimethyl phthalate. Sublimation tomography is performed to obtain their exact 3D geometry, which consists of scanning the cast to obtain the negative geometry of the snow sample. A combination of second and third order extensions of Darcy's law is used to determine permeability, the Dupuit–Forchheimer coefficient and

the third order coefficient. Porosity and specific surface area are obtained by two-point correlation function. It is found that inertial effects, given by the second and third order correction in Darcy's law, influence the air flow even at low Reynolds numbers. Correlations are derived for permeability, the Dupuit-Forchheimer coefficient and the third order coefficient of Darcy's law as a function of density and grain size. Porosity, specific surface area and permeability are compared with the experimentally measured data on the exact same samples and yields good agreement. Tortuosity of each sample is determined. Anisotropy is observed in the three coefficients of the extended Darcy's law, and the anisotropy coefficients for permeability give a range consistent with the literature. The methodology presented allows for the determination of snow's effective mass transport properties, which are strongly dependent on the snow microstructure and morphology and can be readily used in snowpack volume-averaged models. Two different extensions of Darcy's law are used in these two studies, both equations presenting an accurate description of the increase of inertial effects with Reynolds number. Both studies emphasize the importance of the representative elementary volume, which size should not be underestimated for the acquisition of accurate results.

Furthermore, tomography based direct pore-level simulations are used in the field of medical engineering, with an application to bone tissue engineering. Two scaffolds used in a perfusion bioreactor for the in-vitro formation of bones are investigated. Their complex 3D geometries are imaged by micro-computed tomography and used in direct pore-level simulations of the entire scaffold-bioreactor system to numerically solve the governing mass and momentum conservation equations for fluid flow through porous media. The simulations are performed through the entire system comprising the scaffold inside the bioreactor. The velocity field and wall shear stress distribution are determined for both scaffolds. The more regular scaffold, made of polycaprolactone, exhibits an asymmetric distribution of wall shear stress with peak and plateau, while the silk fibroin scaffold, with an irregular microstructure, exhibits a homogeneous distribution and conditions the flow more efficiently than the polycaprolactone scaffold. The methodology guides the design and optimization of the scaffold geometry.

Finally, a reticulated porous ceramic made of cerium oxide designed for solar thermochemical processes is examined. Collision-based Monte-Carlo is used on its 3D geometry obtained by micro-computed tomography to determine its radiative properties. Distribution functions of attenuation path length and scattering angle are computed, yielding the extinction coefficient and scattering phase function. Spectroscopic measurements are carried out to validate the numerically determined extinction coefficient.

The presented methodology is shown to be applicable for various fields. The obtained effective properties can be directly incorporated in volume-

averaged models, such as snowpack models and models for the optimization of solar thermochemical reactors.

Résumé

Cette thèse présente la caractérisation de milieux poreux par l'application de simulations directes au niveau poreux basées sur la tomographie. La méthodologie consiste à obtenir la géométrie exacte en trois dimensions de matériaux poreux en utilisant la micro-tomographie assistée par ordinateur; cette géométrie est ensuite utilisée dans des simulations à échelle discrète pour la détermination de leurs propriétés effectives de transport de masse et de chaleur. Les caractéristiques morphologiques sont obtenues par une fonction de corrélation à deux points ainsi que par des opérations morphologiques. La technique des volumes finis est utilisée pour résoudre numériquement les équations de conservation de masse et de moment pour déterminer les propriétés de transport de masse. Le tracé de rayons de type Monte-Carlo permet l'acquisition des propriétés radiatives.

Les propriétés de transport de chaleur et de masse en milieux poreux sont importantes pour un large panel d'applications, parmi lesquelles l'application à la neige, à l'ingénierie du tissu osseux et aux procédés thermochimiques solaires. Dans chacun de ces domaines, l'étude de la microstructure des milieux multiphasés est essentielle à la compréhension de phénomènes naturels ou à l'amélioration de procédés techniques. A cet effet, la détermination des propriétés de transport effectives de milieux poreux variés utilisées dans des modèles de moyenne volumique est cruciale. La présente thèse traite de la détermination des propriétés de transport de masse de la neige, du niveau de contrainte de cisaillement présente dans des supports poreux servant à la formation de tissu osseux in-vitro, et des propriétés radiatives d'une céramique poreuse réticulée faite d'oxyde de cérium, utilisée dans des procédés thermochimiques solaires.

Deux études différentes sont effectuées sur la neige, chacune sur une série d'échantillons distincte. La première étude prend cinq échantillons en considération, caractéristiques d'une large gamme de neige saisonnière. Leur représentation géométrique en trois dimensions est obtenue par microtomographie assistée par ordinateur et utilisée dans des simulations directes au niveau poreux pour résoudre numériquement les équations de conservation de masse et de moment. L'extension de second ordre à la loi de Darcy est utilisée pour déterminer la perméabilité et le coefficient de Dupuit-Forchheimer. Des

modèles semi-empiriques de milieux poreux simplifiés sont examinés. La deuxième série consiste en 34 échantillons de neige, déjà caractérisés expérimentalement et moulés dans du phthalate de dyméthyle. La technique de tomographie par sublimation est utilisée pour obtenir leur exacte géométrie en trois dimensions. Cette méthode consiste à scanner le moulage afin d'obtenir la géométrie négative de l'échantillon de neige. Une combinaison de la deuxième et de la troisième extension de la loi de Darcy est utilisée pour déterminer leur perméabilité, leur coefficient de Dupuit-Forchheimer et le coefficient de troisième ordre de cette extension. La porosité et la surface spécifique sont obtenues par une fonction de corrélation à deux points. Il est observé que les effets d'inertie, donnés par les corrections de deuxième et de troisième ordre à la loi de Darcy, influencent l'écoulement de l'air déjà à un nombre de Reynolds bas. Des corrélations sont dérivées pour la perméabilité, le coefficient de Dupuit-Forchheimer et le coefficient de troisième ordre de l'extension de loi de Darcy en fonction de la densité et de la taille des grains. La porosité, la surface spécifique et la perméabilité sont comparées avec les données mesurées expérimentalement sur les mêmes échantillons et sont concordants. La tortuosité de chaque échantillon est déterminée. De l'anisotropie est observée pour les trois coefficients de la version corrigée de la loi de Darcy, et les coefficients d'anisotropie pour la perméabilité donnent des valeurs en accord avec la littérature. La méthodologie présentée permet la détermination des propriétés effectives de transport de masse de la neige, lesquelles sont fortement dépendantes de la microstructure et de la morphologie de cette dernière et peuvent être utilisées telles quelles dans des modèles de moyenne volumique du manteau neigeux. Deux extensions différentes de la loi de Darcy sont utilisées dans ces études, les deux présentant une description précise de l'augmentation de l'inertie avec le nombre de Reynolds. Ces deux études soulignent l'importance du volume élémentaire représentatif, dont la taille ne doit pas être sous-estimée pour l'acquisition de résultats précis.

De plus, les simulations basées sur la tomographie au niveau poreux sont utilisées dans le domaine de l'ingénierie médicale, plus particulièrement de l'ingénierie des tissus osseux. Deux matériaux de support utilisés dans un bioréacteur de perfusion pour la formation in-vitro de tissu osseux sont examinés. Leur géométrie complexe en trois dimensions est imagée par microtomographie assistée par ordinateur et utilisée dans des simulations directes au niveau poreux de l'entier du système support-bioréacteur afin de résoudre numériquement les équations de conservation de masse et de moment pour le flux de fluide en milieu poreux. Les simulations sont effectuées sur l'entier du système comprenant le support poreux et le bioréacteur l'entourant. Le champ de vitesses et les contraintes de cisaillement sont déterminés pour les deux supports. Le support le plus régulier, constitué de polycaprolactone, présente une distribution asymétrique des contraintes de cisaillement avec un

pic et un plateau, tandis que le support fait de fibroïne de soie, avec une structure irrégulière, présente une distribution homogène et conditionne le flux plus efficacement que le support de polycaprolactone. La méthodologie guide la conception et l'optimisation de la géométrie du support.

Finalement, une céramique poreuse réticulée faite d'oxyde de cérium conçue pour des procédés thermochimiques solaires est étudiée. La méthode de Monte-Carlo basée sur des collisions est utilisée sur sa géométrie en 3D obtenue par micro-tomographie assistée par ordinateur pour déterminer ses propriétés radiatives. Des fonctions de distribution de l'atténuation de la longueur du trajet et d'angle de diffusion sont calculées, afin d'obtenir le coefficient d'extinction et la fonction de phase de diffusion. Des mesures spectroscopiques sont effectuées pour valider le coefficient d'extinction déterminé numériquement.

Il est montré que la méthodologie présentée est applicable à des domaines variés. Les propriétés effectives obtenues peuvent être incorporées directement dans des modèles de moyenne volumique, tels que des modèles de manteau neigeux ou d'optimisation de réacteurs thermochimiques solaires.